様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９、Ｚ－１９　（共通）

科研費 KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 ２６ 年　 ６ 月 ２３ 日現在

機関番号：１４５０１
研究種目：基盤研究(C)
研究期間：2010～2013
課題番号：２２５４０３８８

研究課題名（和文）テンソル積状態の極小原理による最適化と量子系への応用

研究課題名（英文）Optimization of tensor network states by means of a minimal principle and applicatio ns to quantum systems

研究代表者
西野　友年（Nishino, Tomotoshi）

神戸大学・理学（系）研究科（研究院）・准教授

研究者番号：００２４１５６３

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　3,100,000円、（間接経費）　930,000円

研究成果の概要（和文）：テンソル積状態は、相関を持つ量子系を精密に近似し得る能力を持っている。テンソルの最適化においては、その周囲の環境の構成が重要である。本研究では、境界条件に着目した。相互作用定数が、スムーズにゼロへと減少する正弦変形、その逆に増加して行く双曲変形などを１次元量子系に課した。この場合、系の非一様性にもかかわらず、テンソル積状態が一様性を保ったまま最適化されて行くのである。この一見すると矛盾している関係が成立している事実を、密度行列繰り込み群などテンソル積形式に基づいた数値計算により明らかにした。

研究成果の概要（英文）：The tensor network states has a hight potential of expressing or approximating a given quantum state wave function. For an efficient optimization of each local tensor, the construction of the environment around the tensor is important. In this study, we focus on the boundary condition, i.e. the smooth boundary condition, where the interaction parameter gradually decreases to zero toward the system boundary, the hyperbolic deformation, where the parameter increases to the boundary. These conditions are imposed to one dimensional free or correlated quantum systems. Under these deformation, despite of the non-uniformity in the Hamiltonian, the corresponding ground state is uniform, and the local tensors are optimized in a homogeneous manner. The fact is confirmed by means of the density matrix renormalization group, which is a representative numerical tool to optimize local tensors. Several other trials on the tensor network state are also reported.

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：数理物理・物性基礎

キーワード：テンソル積状態　DMRG　繰込み群　双曲変形　エンタングルメント　境界条件　正弦２乗変形　変分計算

１．研究開始当初の背景

量子状態を局所因子の積として表現した「テンソル積状態」が、非自明な相関を持つ低次元量子系の記述に有効であることは、密度行列繰り込み群(DMRG)の数値的な成功と、その発展形式であるテンソル積（変分）形式の２次元量子系への応用を通じて、過去１０年余の間、次第に明らかとなって来た。充分に最適化されたテンソル積状態は、参照する量子状態を精密に近似し得る能力を持っているのである。しかしながら、テンソル積状態を構成する個々の局所テンソルについて要素の最適化を行う計算手法は、あまり効率的ではない状況であった。例えば、それぞれの脚の最適な次元の決定方法が大局的に最適かどうかは現在でも不明なのである。このような問題が起きる一因は局所テンソルの最適化において、テンソル周囲の「環境」を考慮しつつ行わなければならない点にある。環境を構成する際には過大な数値計算が必要となるのである。従って、問題解決のひとつの着目点は、自然な環境の構成方法にあった。

局所テンソルを取り囲む環境は、系全体の境界条件を反映するものである。有限系であれば、固定端条件、自由端条件、周期境界条件などの境界条件のいずれかが課されているはずであり、それらを適切に考慮する処理が求められる。更に、系の性質を熱力学極限において知ろうとすれば、無限系を取り扱うか、あるいは有限サイズ・スケーリングを通じて無限系への外挿を行うこととなる。これら旧来より知られて来た解析手法と、テンソル積形式との関係については、視点を新たにして整理し直す時期であった。

テンソル積形式は主に、一様な周期系へ応用されて来た。乱れを含む系への応用も散見されはするが、強い乱れの極限で用いることができる実空間繰込み群の応用例などを除いて、目立った成果は得られていなかった。また、対象となる系に、比較的ゆっくりとした摂動が加わるような場合につても、テンソル積形式の視点からの研究は未開拓の状況であった。加えて、無限で一様なテンソル積状態の「一部だけが異なる」ような場合、例えば瞬間的な局所励起の取り扱いについても、それを取り扱う環境の構成方法は未知であった。

２．研究の目的

テンソル積状態の効率的な最適化手法を探索し、前項で述べた問題を解決あるいは軽減する道筋を与えることが、本研究の主な目的である。最適化する対象であるテンソルを取り囲む環境は、それ自身がテンソルの積の縮約として記述されるものである。従来の研究では、その縮約をいかに効率的に行うかを主眼として来た。このような、数値計算上のテクニカルな工夫は継続して行う必要がある。しかしながら、数値計算的な「力技」には限界もある。言い換えるならば、対象とする物理系の性質を考慮せずに、一般的な計算アルゴリズムのみを探求するのは「汎用性という非効率」を抱える遠因なのである。本研究では系の物理的な性質、特にエンタングルメントの距離依存性などをも考慮しつつ、テンソル積状態の最適化全般を効率化して行くこと念頭に置く。

環境の構成方法として、特に着目するのが境界条件の設定方法である。従来より開放端、固定端、周期境界条件などが使われて来たが、本研究では系の中央から次第に相互作用定数が大きくなって行く「双曲的な変形を受けた」境界条件と、それとは逆に相互作用定数が漸減して行く「正弦２乗的な変形を受けた」境界条件を新たに考慮し、それらが系の振る舞いに与える影響を探る。この方向は、研究計画の段階で幾つか掲げた目的の１つであり、本研究を経て得られた結果としては一番得ることが多かったものである。一様な無限系の一部のみの変化、あるいは時間発展を考える場合には、ある領域より外側では無限に同じテンソルが並ぶ形のテンソル積状態を組むこととなる。その数値的な取り扱いについても、併せて検討課題とした。

量子系の境界条件問題と関連して、双曲空間中の古典統計モデルも解析の対象とした。n 次元量子系は、いわゆる量子・古典対応を通じて n+1 次元古典系に対応づけることができる。今考えたような、１次元量子系における相互作用定数のゆっくりとした変化は、対応する古典系を「曲がった空間」の中で取り扱うことに相当している。従って、フラットではない空間中に置かれた古典統計模型の性質、特にその相転移を観察し、その臨界現象（の有無）を探ることもまた、研究目的の一つとした。

３．研究の方法

計算手法の開発として参照するモデルは、量子系においては相互作用の変化を含んだ１次元 S=1 ハイゼンベルグ模型、ハバード模型、量子イジング模型などであり、古典系においては双曲格子上に置かれたイジング模型である。前者については、密度行列繰り込み群を主な解析手法として用いた。これは、基底波動関数をテンソル積の一種である行列積で表現し、局所的なテンソル最適化を反復的に行うもので、数値計算的には安定して「ほぼ最適な」局所テンソルが得られることが知られている。また、いわゆる有限系アルゴリズムを用いれば、相互作用定数のゆっくりとした変動も容易に取り扱うことができる。相互作用の変形（空間変化）が双曲的であれ、正弦的であれ、用いる計算手法は全く同じである。但し、テンソル最適化の収束の様子は変形の種類によって異なって来る。双曲変形の場合、系の相関は短距離となる傾向があり、最適化は速く進む。一方で正弦的な場合は、弱いエネルギースケールが系に含ま

れる関係もあって、遠距離相関が残り、結果としてテンソル最適化は多少遅くなる。但し、実際的なシステムサイズでは、この遅延は問題とならないことが多い。

双曲格子上のイジング模型については、密度行列繰り込み群から派生した、角転送行列繰込み群を用い、解析を行った。角転送行列繰り込み群を双曲格子に適用する方法は、双曲格子が測地線により二分される場合については既に得られていたが、なるべく多様な双曲格子についてデータを集めるために、本研究では新たな計算アルゴリズムを採用した。結果として、三角形の規則的なタイリングで表現される双曲格子すべてについて、相転移のデータを集めることが可能となった。

以上の手法に加え、テンソル・エンタングルメント繰込み群と、動的なブロック繰込みを用いる TEBD 法なども導入し、主に無限系を対象として試験的な計算を行った。

４．研究成果

双曲的に変形された１次元量子系については、テンソル積を用いて相関系の解析を行う準備として、自由場に対する影響を調べた。一次元のスピンレス・フェルミ格子について、相互作用が双曲的な空間変調を持つ系では、その変調を表す関数因子が長さのスケールを与え、有限のフェルミ粒子密度の下であっても、相関距離が有限となることが判明した。[論文 7]　この関係が、相関系である S=1 スピン鎖について成立していることは容易に確認でき、基底状態からの素励起が前述のフェルミ粒子と共通のスケーリング関係式を満たすことが判明した。[論文 4] いずれの場合も、相関距離は有限となり、有効的には開放端の境界条件と共通する振る舞いが局所テンソルの最適化において現れたと、解釈することが可能であるだろう。

双曲的に変形された量子系に対応する古典系として導入した、双曲格子上のイジング模型については、研究手段で述べた角転送行列繰り込み群を用いて、系の中心付近の平衡状態と、その相転移を観察した。その結果、秩序・無秩序相転移は２次相転移であり、磁化に関する限り相転移のユニヴァーサリティーは平均場的であることがわかった。また、量子・古典対応を通じて導入した「古典系のエンタングルメント・エントロピー」は、相転移点上で有限であることが判明した。[論文 8] いわゆるエリアルールを通じて、エンタングルメント・エントロピーより相関距離を見積もることもできる。その結果、相転移点上での相関距離は有限にとどまることが判明した。これは、前述の平均場的な振る舞いと一見すると矛盾しているように映る。しかしながら、ベーテ格子上での相転移でも同様な現象は発現する。系が双曲的であるということは、結果としてベーテ格子的な振る舞いを呼び起こすのである。[論文 2] 双曲格子の内、その曲率が小さな場合を取り扱う手法も開発した。相転移については、同様な振る舞いが観察され、転移点上での相関距離は、系の極率半径のオーダーであることが確認された。[arXiv:1403.5377] これらの結果を踏まえて、対応する量子系である「双曲変形された一次元横磁場イジング模型」について相転移解析を行った。[arXiv:1008.3458] この解析結果については、境界条件の解釈を巡って議論あり、まだ出版には至っていない。

再び量子系に話を戻すと、相互作用が正弦的に変化する場合、開放端（あるいは固定端）境界条件であるにもかかわらず、系の基底波動関数が周期境界条件下のものと一致する現象が、自由フェルミ系についてしられていた。この不思議な一致が、S=1/2 ハイゼンベルグ・スピン系と、そのパラメター変形である XXZ 模型についても成立するかどうか、数値計算を行ったところ、このような相関系でも同様な効果が得られることが判明した。[論文 6] スピンを持つフェルミ系の代表例である、ハバード模型についても、同じように開放端条件と正弦的な変形の組み合わせが、周期境界を呼び起こすことが確認できる。[論文 5] この不思議な一致は、桂らによって解析的な原因が解明される所となった。これらの成果をまとめて、日本物理学会の会誌に掲載した。[論文 3]

変形が双曲的であれ正弦的であれ、局所テンソルは一様性を保ったまま最適化される。これは、相互作用が非一様であることとは対照的な現象である。さて、テンソル積が無限一様である条件下で、局所的な擾乱が置きると、その影響は波のように広がって行く。波の先端では、その変化を継続的に追うことが可能となる。この計算手法を、動的なテンソル積形式と組み合わせた結果を arXiv: 1207.0862 として報告した。(著者間での意見の相違があり、まだ出版可能な形にはまとめられていない。) 無限・一様なテンソルは、いわゆるテンソル・エンタングルメント繰込み群にも現れる。この場合のエンタングルメント変化は、本研究テーマとは少し関係が薄いものではあるが、発展的な課題として取り組み、エンタングルメント・スペクトルが二重化されることが判明した。[論文 1]

以上の成果については機会あるごとに、統合的な視点から総括的な発表を行って来た。個々にとりあげはしないが、内容については下記の「学会発表」等の題目を参照されたい。

５．主な発表論文等
（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計８件）

[1] H. Ueda, K. Okunishi, T. Nishino, "Doubling of Entanglement Spectrum in Tensor Renormalization Group", Phys. Rev. B 89 (2014) 075116, pp. 1-10. [査読有]

[2] Gendiar, R. Krcmar, S. Andergassen, M. Daniska, T. Nishino, "Weak correlation effects in the Ising model on triangular-tiled hyperbolic lattices", Phys. Rev. E 86 (2012) 021105, pp. 1-8. [査読有]

[3] **引原俊哉，桂法称，丸山勲，西野友年，"エネルギー・スケール変調による量子系の境界条件・トポロジーの制御"，日本物理学会誌** 67, No. 6 (2012) 394, pp. 394-397. [査読有]

[4] H. Ueda, H. Nakano, K. Kusakabe, T. Nishino, "Hyperbolic Deformation Applied to S=1 Spin Chains; Scaling Relation in Excitation Energy" J. Phys. Soc. Jpn. 80 (2011) 094001, pp. 1-5. [査読有]

[5] A. Gendiar, M. Daniska, Y. Lee, T. Nishino, "Suppression of finite-size effects in one-dimensional quantum systems". Phys. Rev. A 83 (2011) 052118, pp. 1-7. [査読有]

[6] T. Hikihara, T. Nishino, "Connecting distant ends of one-dimensional critical system by sin-square deformation", Phys. Rev. E 83 (2011) 060414, pp. 1～4. [査読有]

[7] H. Ueda, H. Nakano, K. Kusakabe, T. Nishino, "Scaling Relation for Excitation Energy Under Hyperbolic Deformation", Prog. Theor. Phys. 124 (2010) pp. 389-398. [査読有]

[8] T. Iharagi, A. Gendiar, H. Ueda, T. Nishino, "Phase Transition of the Ising model on a Hyperblic Lattice", J. Phys. Soc. Jpn. 79 (2010) 104001, pp. 1-4. [査読有]

〔学会発表〕（計１３件）

[1] T. Nishino, "The most distant sites are neighbors under the sine square deformation", Workshop on Numerical Many Body Methods in Quantum Chemistry and Physics, 2013. 12. 4, Bangalore, India.

[2] T. Nishino, "Entanglement Spectrum in the Tensor Renormalization Group", PQMBE2013, 2013. 9. 25, Maintz, Germany.

[3] T. Nishino, "What should be Approximated in RG schemes applied to Statistical Models?", Tensor Network Algorithms in Computations Physics and Numerical Analyses, 2013. 5. 17, ETH Zurich, Switzerland.

[4] T. Nishino, "DMRG applied to Transfer Matrix Formalisms", DMRG101, 2012. 12. 9, **台湾大学，台湾**.

[5] T. Nishino, "Entanglement Entropy Under non-Uniform Deformation", Workshop QISM2012, 2012. 9. 22, Innsbruck, Austria.

[6] T. Nishino, "Non-Uniform Deformation Applied to 1D Quantum Systems", Networking Tensor Networks, 2012. 5. 7, Benasque, Spain.

[7] **西野友年**, Andrej Gendiar, "Hubbard Model **に正弦変形かけてみちゃったの"，日本物理学会**, 2012. 3. 27, **関西学院大学**.

[8] T. Nishino, "Absence of Boundary Effect under Sine-Square Deformation", Workshop QISM2011, 2011. 7. 23, A Coluna, Spain.

[9] T. Nishino, "Ising Model on Hyperbolic Lattices", UCM Summer School, 2011. 7. 15, El Escorial, Spain.

[10] **西野友年，"エンタングルメントで解決できるもの、できないもの"，研究会・量子系のエンタングルメントとくりこみ群** 2011. 12. 14, **基礎物理学研究所**.

[11] **西野友年**, Andrej Gendiar, "**双曲のイジングモデル相転移けふも調べて熱力語る"，日本物理学会**, 2011. 3. 25, **新潟大学**.

[12] T. Nishino, "An Origin of Matrix Product States in Statistical Mechanics", Workshop on DMRG and other advances in numerical RG methods, 2010. 8. 26, **中国人民大学**.

[13] T. Iharagi, H. Ueda, T. Nishino, "Phase Transition on Hyperbolic Lattice Analized by CTMRG", STATPHYS24, 2010.7. 20, Cairns Convention Center, Australia.

〔図書〕（計１件）
[1] **西野 友年，講談社「今度こそわかる場の理論」**(2012) 215 **ページ**.

〔産業財産権〕
○出願状況（計０件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：

番号：
出願年月日：
国内外の別：

○取得状況（計０件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

〔その他〕
ホームページ等
http://quattro.phys.sci.kobe-u.ac.jp/dmrg.html（密度行列繰込み群及びテンソルネットワーク形式についてのプレプリント集）

６．研究組織
(1)研究代表者
西野 友年（TOMOTOSHI NISHINO）
神戸大学大学院理学研究科
研究者番号：00241563

(*)海外研究協力者
Andrej Gendiar
Independent Researcher
Slovak Academy of Sciences

Roman Krcmar *
Slovak Academy of Sciences
Researcher
* JSPS Postdoctral Fellowship for Foreign Researchers (Kobe University)